

液相色谱-高分辨质谱仪 YS HR 1080MD

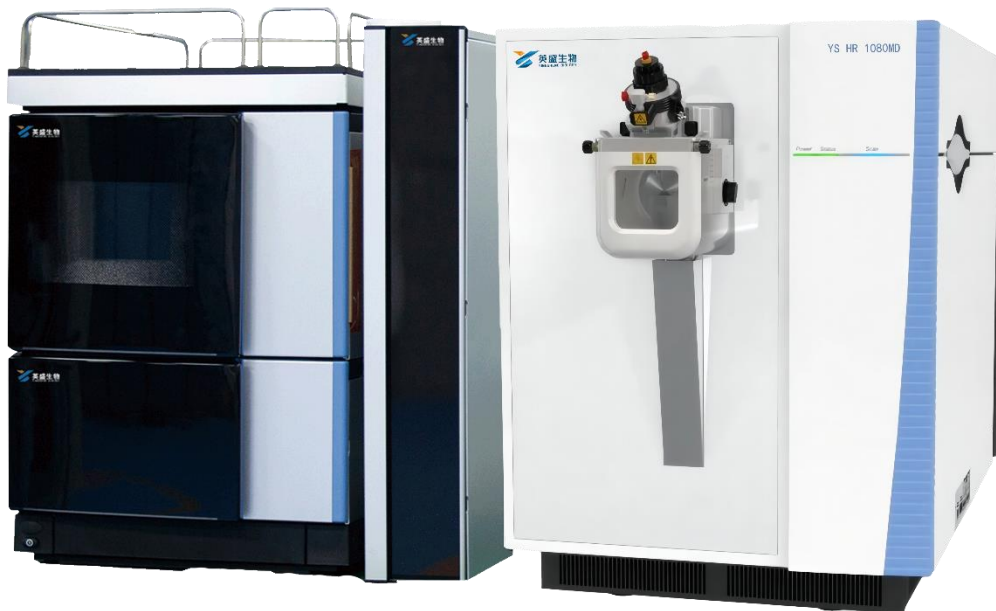
技术白皮书

型号：YS HR 1080MD

品牌：英盛生物

原产地：中国

主要用途：用于复杂基质中已知及未知化合物定性定量。如应用于各类农产品、食品、药品、化妆品、环境水、司法检材等基质中的农药残留、兽药残留、添加剂和毒素检测分析及组学研究。



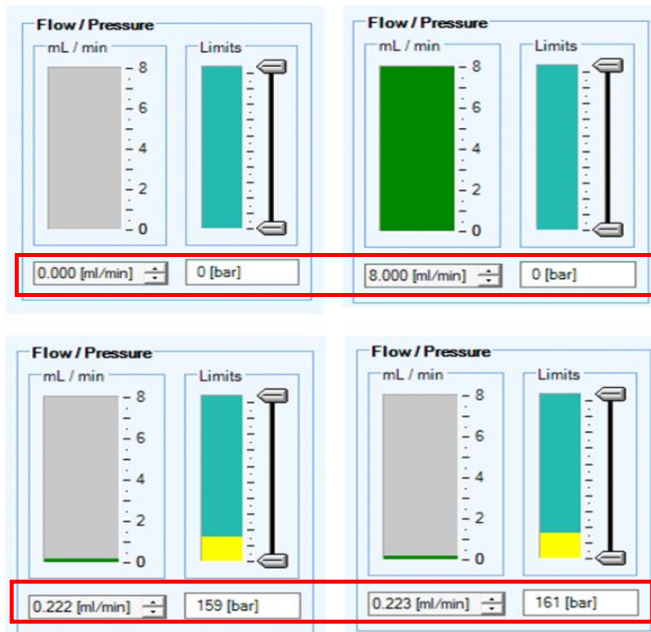
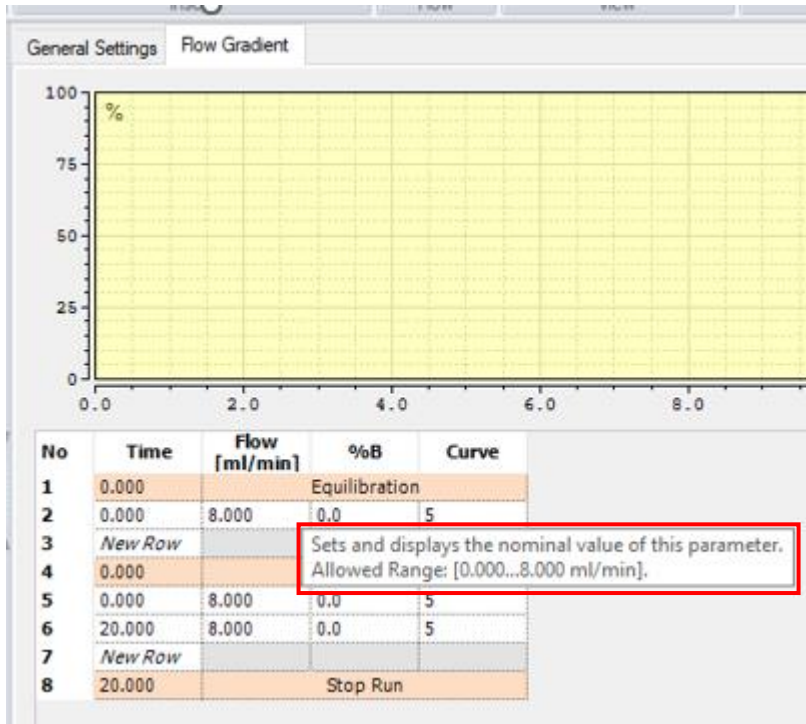
一、设备技术参数

(1) 超高效液相色谱仪技术规格

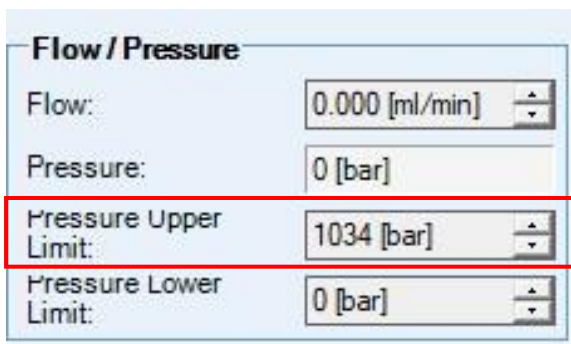
1、二元高压泵

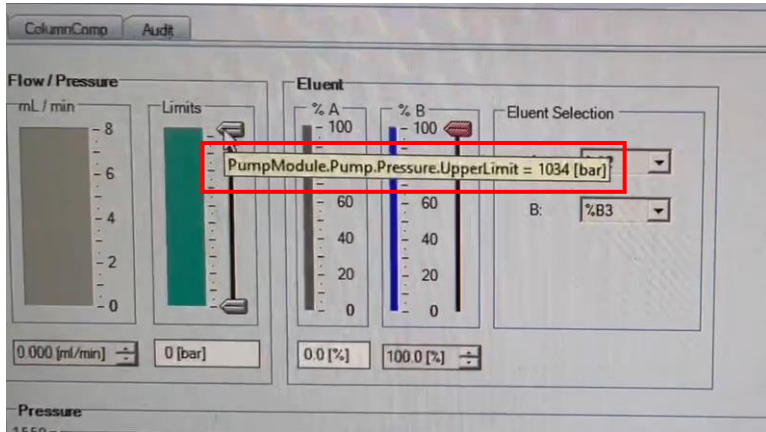
1.1 操作原理：串联双柱塞泵，二元高压梯度系统，每个泵能独立控制 3 个流路，2 个泵控制 6 路流路，可进行 2 个泵 6 路流路之间的任意切换。

1.2 流量范围：0.001-8.000 mL/min，增量 0.001mL/min。软件界面截图如下：



1.3 最大压力：103.4MPa（1034bar），软件界面截图如下：





1.4 压力波动: <1.0%

1.5 流量准确度: $\pm 0.1\%$

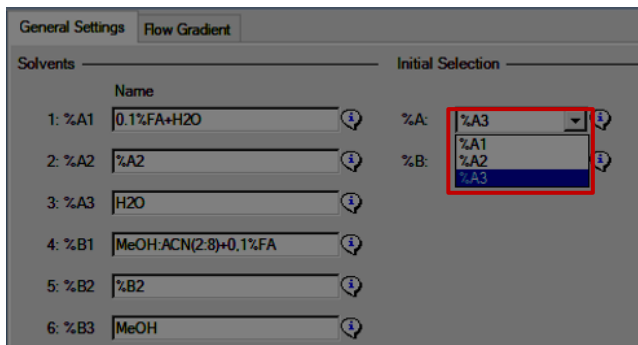
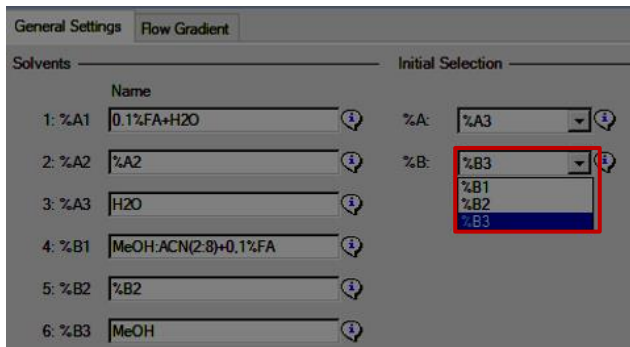
1.6 流量精密性: <0.05%RSD (流速在 0.35mL/min 下)

1.7 梯度 (混合) 准确度: $\pm 0.2\%$ (满量程)

1.8 梯度 (混合) 精密性: <0.15%SD (流速在 0.35mL/min 下)

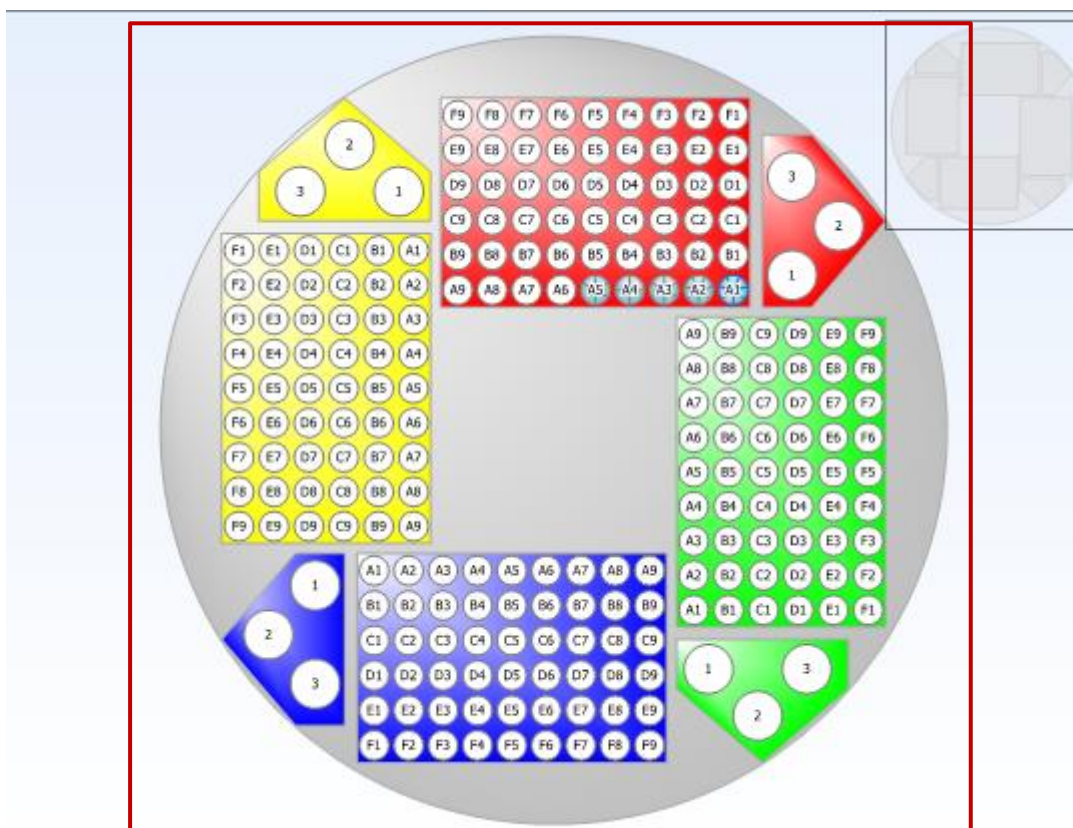
1.9 混合器体积: 200 μ L (包括静态混合器 150 μ L 和毛细管混合器 50 μ L)

1.10 在线真空溶剂脱气通道: 6 路



2、温控自动进样器

2.1 样品盘: 216 位 (1.5 mL 或 2.0mL 样品瓶), 兼容 4 个 96 孔板模式进样。



2.2 最大耐压：103.4MPa（1034bar）

2.3 进样体积范围：0.01-100 μL ，最小步幅为 0.01 μL

2.4 进样量准确度： $\pm 0.5\%$ （10 μL 水进样）

2.5 进样量精密度： $< 0.25\%$ 峰面积 RSD（0.1-5 μL 咖啡因水溶液）

2.6 进样交叉污染： $\leq 0.002\%$

• **Chromatogram for Carry Over Test**



• **Data for Carry Over Test**

<i>Injection Name</i>	<i>Ret. Time min</i>	<i>Area mAU*min</i>	<i>Carry over *</i>
	<i>UV_VIS_1</i>	<i>UV_VIS_1</i>	
	<i>Caffeine</i>	<i>Caffeine</i>	
CO_RC_reference (0.004 µg/mL)	0.43	0.0235	
CO_RC_reference (0.008 µg/mL)	0.44	0.0394	
CO_RC_reference (0.012 µg/mL)	0.43	0.0543	
CO_RC_reference (0.016 µg/mL)	0.43	0.0727	
Inject solvent Vial 1	n.a.	n.a.	< 0.0001%
Limit:			0.002%
Result:			ok

*Limit of Quantification (LoQ) = 0.0001 %

2.7 样品室温度范围：4~40℃

Direct Control

Take Control Consumables < Autogenerated >

Home Pump **Sampler** ColumnComp Audit

Module Status

Connected

Ready

Retention Time:

Rack Control

Segment: Red

Rack Type: ThermoVial54

Present: Occupied

Reset Change Rack

Module Connect

Connect

Needle Wash

Wash Needle

Time: 5.0 [s]

Purge Needle Wash

Temperature Control

Control

Nominal: 4.0 [°C]

Current: 4.0 [°C]

Inject

Position: R:F3

Volume: 2.00 [µl]

Inject

Stop Inject

Cleanup

Injection Valve

Current Position:

Inject

To Inject Position

To Bypass Position

Doors

Left: Closed

Right: Closed

Leak Alarm

Mode

Status: NoLeak

Mute Alarm

More Options...

Module Information...

Home Pump **Sampler** ColumnComp Audit

Module Status

Connected

Ready

Retention Time:

Rack Control

Segment: Red

Rack Type: ThermoVial54

Present: Occupied

Reset Change Rack

Module Connect

Connect

Needle Wash

Wash Needle

Time: 10.0 [s]

Purge Needle Wash

Temperature Control

Control

Nominal: 40.0 [°C]

Current: 41.3 [°C]

Inject

Position: R:A4

Volume: 5.00 [µl]

Inject

Stop Inject

Cleanup

Injection Valve

Current Position:

Inject

To Inject Position

To Bypass Position

Doors

Left: Closed

Right: Closed

Leak Alarm

Mode

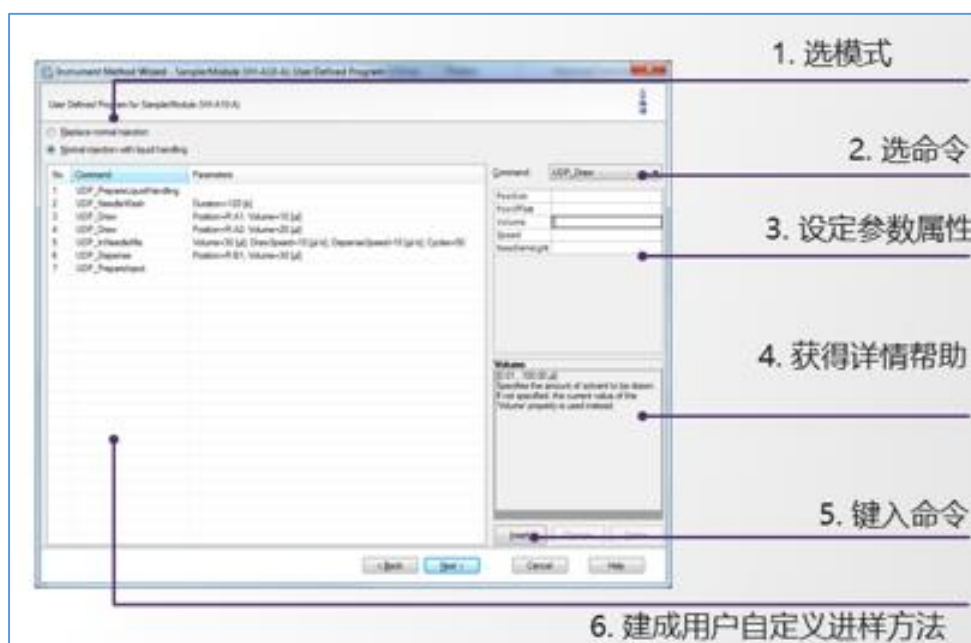
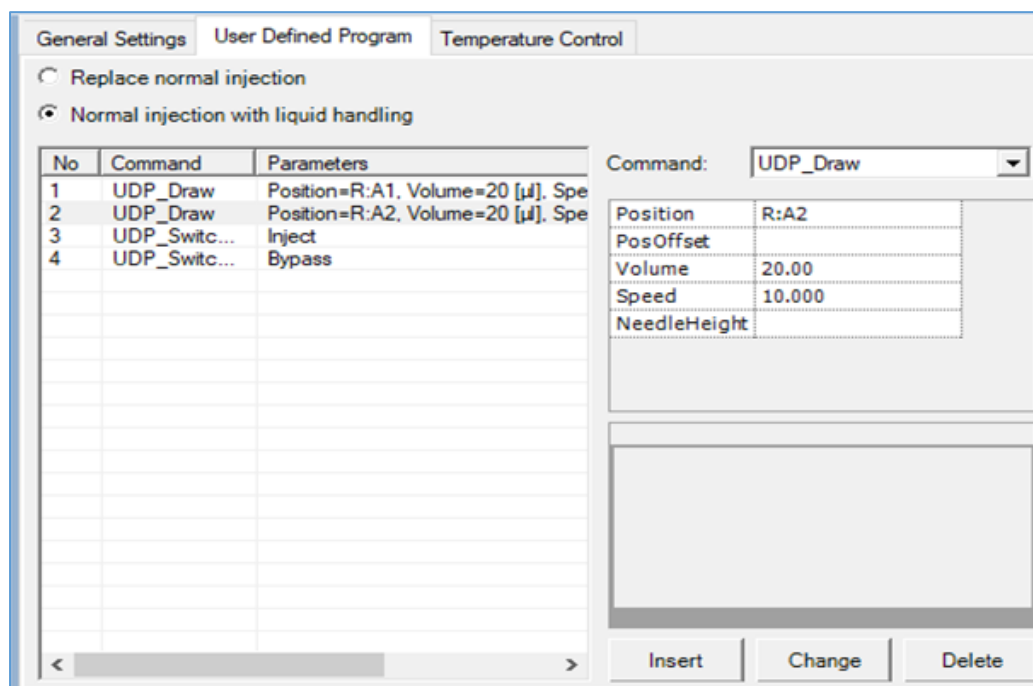
Status: NoLeak

Mute Alarm

More Options...

Module Information...

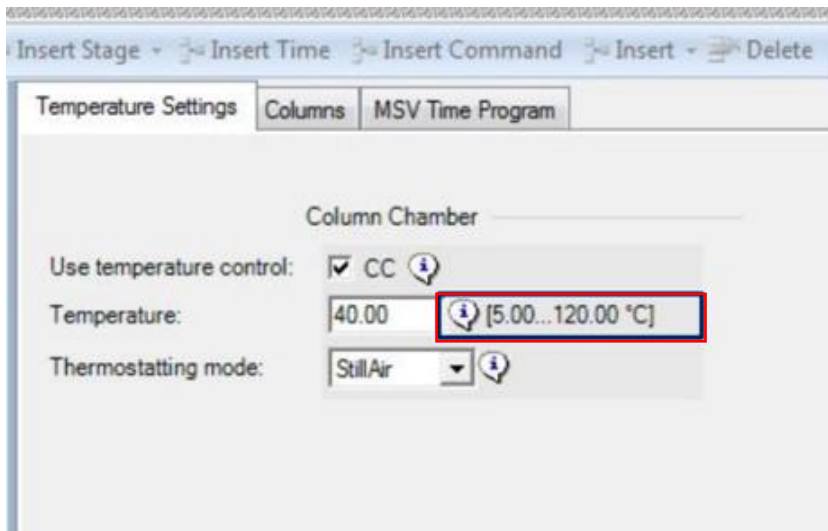
2.8 具有用户自定义进样功能，具有在线稀释和在线衍生功能



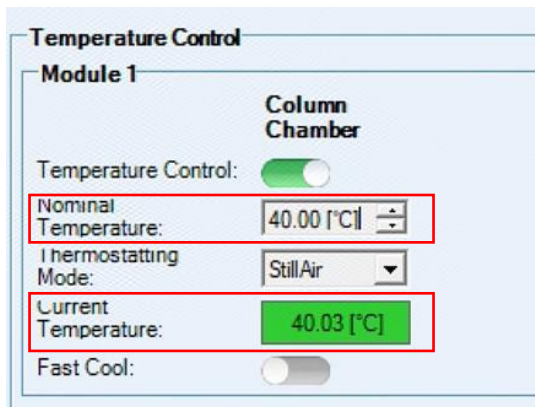
3、柱温箱

3.1 操作原理：帕尔贴结合空气循环模式和直热模式，即双模式温控。

3.2 柱温箱控温范围：5~120 °C，软件界面截图如下：



3.3 温度精度： $\leq \pm 0.05\text{ }^{\circ}\text{C}$ ，软件界面截图如下：



3.4 温度准确度： $\leq \pm 0.5\text{ }^{\circ}\text{C}$

3.5 加热功能：从 $20\text{ }^{\circ}\text{C}$ 加热到 $50\text{ }^{\circ}\text{C}$ 低于 15 分钟

3.6 冷却功能：从 $50\text{ }^{\circ}\text{C}$ 冷却到 $20\text{ }^{\circ}\text{C}$ 低于 15 分钟

3.7 柱温箱容量：兼容 5cm、10cm、15cm、20cm、25cm、30cm 等各种规格色谱柱（带保护柱），可同时放置 2 根 30cm 色谱柱。

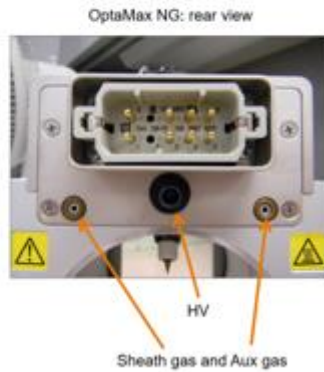
（2）高分辨质谱仪技术规格

1、质谱类型

采用四极杆与静电场轨道阱二级质量分析器串联的超高分辨质谱仪，一次进样可同时采集高分辨一级 MS 和 MS/MS 谱图。

2、ESI 离子源

2.1 离子源采用全内置式气路电路，无需进行外部气路电路管路连接，安装离子源时即可实现气路电路连接并自动识别。

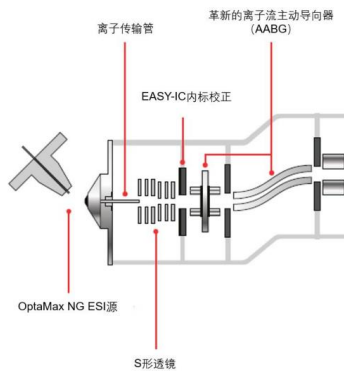


2.2 ESI 离子源可独立加热，最高加热温度可达 550 °C，不分流的情况下最大流速可达 3mL/min。

ION SOURCE	DEFINE SCAN	CALIBRATION	OPTIMIZATION
Current LC Flow (μL/min)	3000		Get Defaults
Ion Source Type	Heated ESI		
Pos Ion Spray Voltage (V)	4000		3925.2
Neg Ion Spray Voltage (V)	0		
Sheath Gas (Arb)	35		35.0
Aux Gas (Arb)	10		10.0
Sweep Gas (Arb)	1		1.0
Ion Transfer Tube Temp (°C)	400		400.5
Vaporizer Temp (°C)	550		550.1

2.3 具有雾化气、辅助雾化气和吹扫气设计，进一步提高雾化效率和喷雾稳定性且具有良好的抗污染能力。

2.4 ESI 离子源位置可根据样品的测试要求进行前后、左右直线型、上下三维调节，在采集数据时可以固定位置。



离子源照片显示了喷针前后“1/2/3”，左右，上下“L/M/H”三维可调，方便对喷雾条件进行优化。

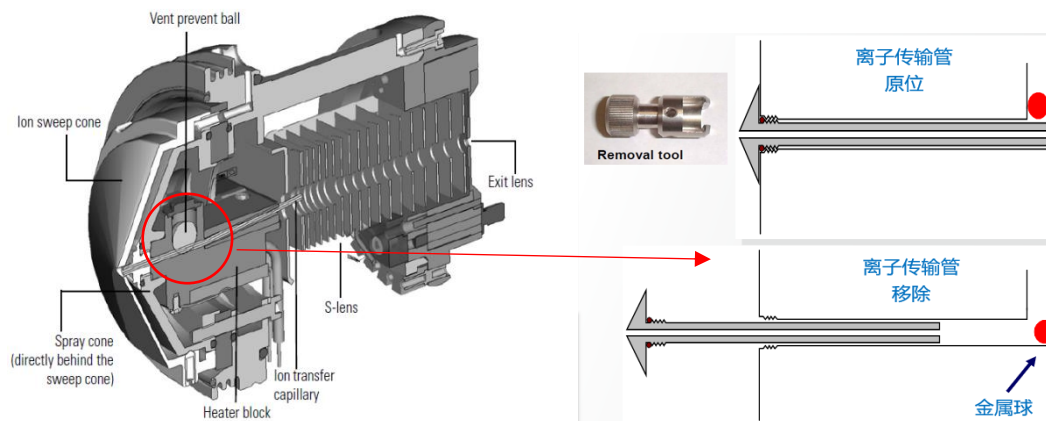
2.5 内标校正离子源：自动实时校正一级质谱和二级质谱，连续工作 5 天质量偏差 ≤ 1 ppm。

2.6 全自动注射泵实现质谱直接进样，自动调谐和校正。

2.7 离子源腔体具有观察窗口，可以直接观察喷雾效果以及离子源腔体洁净程度。

3、离子传输系统

3.1 具有真空隔断阀设计，在移去、安装离子传输管时，无需卸真空，减少宕机时间，不影响实验进程。



(该截图为离子传输管拆卸过程中不用卸真空的示意图)

3.2 导入系统为离子传输管设计，离子传输管为可加热非损耗金属材质。

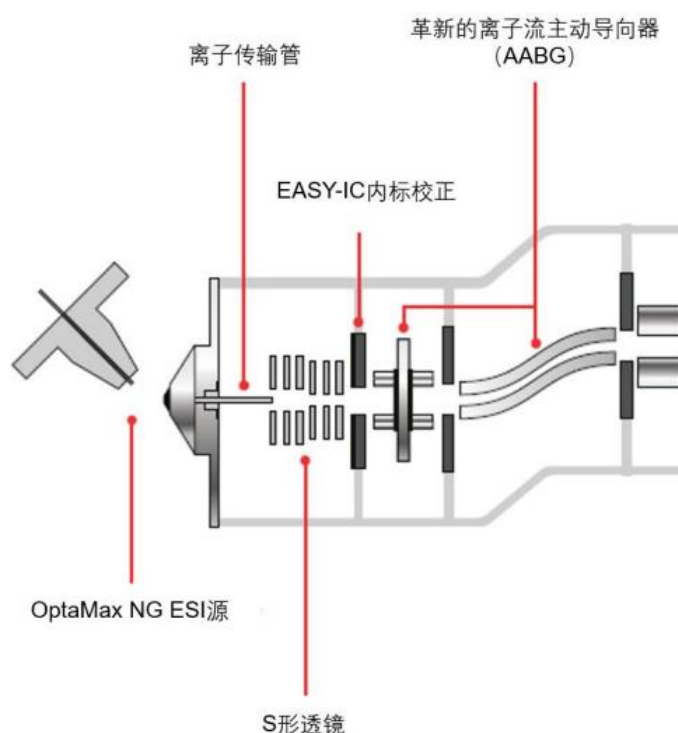


3.3 金属材质传输管最高加热温度：400 °C

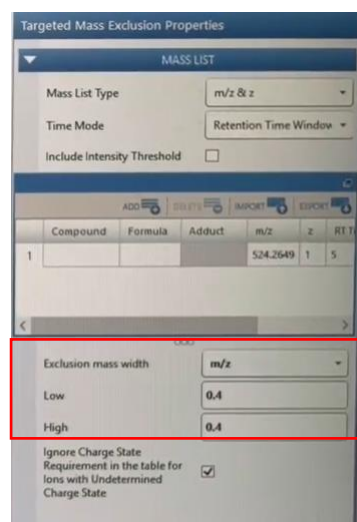
ION SOURCE	DEFINE SCAN	CALIBRATION	OPTIMIZATION
Current LC Flow ($\mu\text{L}/\text{min}$)	3000		Get Defaults
Ion Source Type	Heated ESI		
Pos Ion Spray Voltage (V)	4000		3925.2
Neg Ion Spray Voltage (V)	0		
Sheath Gas (Arb)	35		35.0
Aux Gas (Arb)	10		10.0
Sweep Gas (Arb)	1		1.0
Ion Transfer Tube Temp ($^{\circ}\text{C}$)	400		400.5
Vaporizer Temp ($^{\circ}\text{C}$)	550		550.1

3.4 配置离子传输透镜，传输透镜带离轴电场，过滤中性粒子等污染物，保持离子传输通道

的干净，减少噪音，提高灵敏度和仪器耐用性。

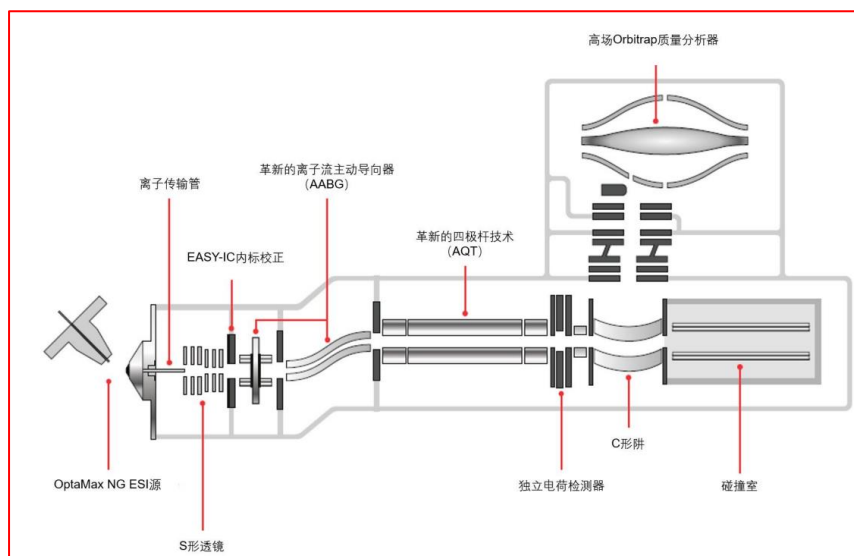


3.5 Q1 为分段式双曲面金属钨四极杆，分辨率可到 0.4Da，隔离窗口宽度从 0.4Da-1200Da 范围内可调，并可以将四极杆设定此分辨率下进样样品检测。软件界面截图如下：



3.6 Q2 离子碰撞室：多极杆设计，使用高纯氮作为碰撞气，碰撞室能够高效捕集离子并对离子进行碎裂，设备可根据母离子质荷比自动调整碰撞能量大小，两种碰撞能量模式（NCE 和 CE）可选，以获得更好的二级谱图。

4、质量分析器：采用四极杆与静电场轨道阱串联的组合

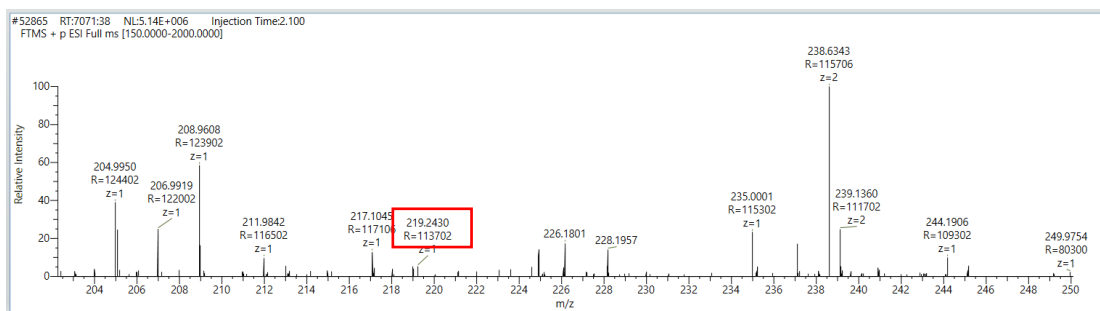


4.1 分辨率

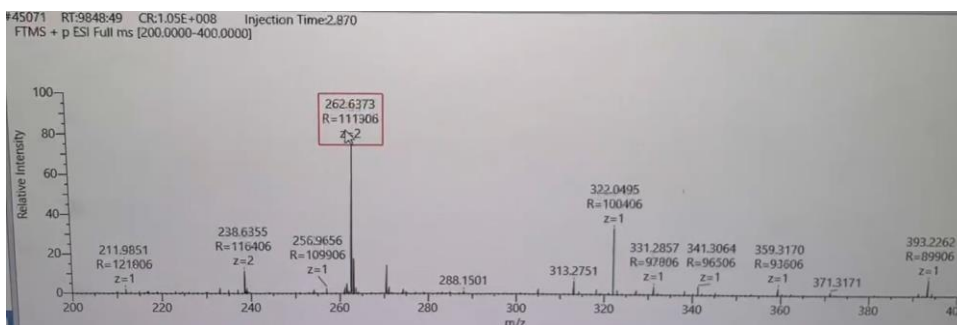
4.1.1 一级质谱分辨率: >100,000 FWHM ($m/z \leq 200$)

4.1.2 二级质谱分辨率: >100,000 FWHM ($m/z \leq 200$)

4.1.3 m/z 200-240 范围内, 质谱分辨率: >100,000 FWHM

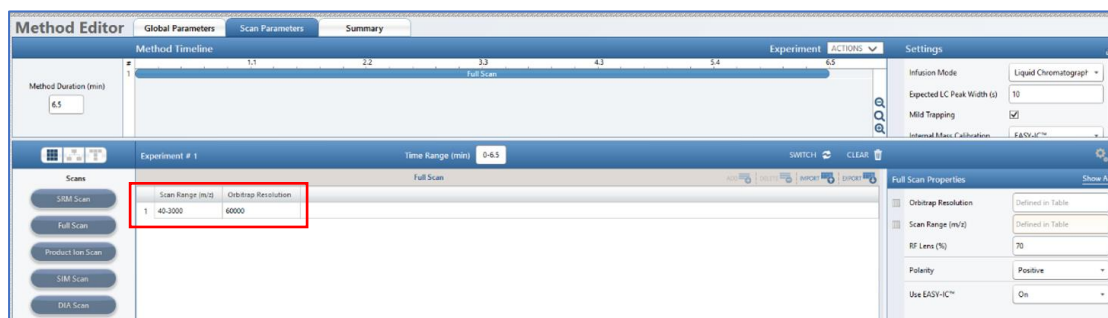


4.1.4 m/z 40-400 范围内, 质谱最高分辨率: >100,000 FWHM

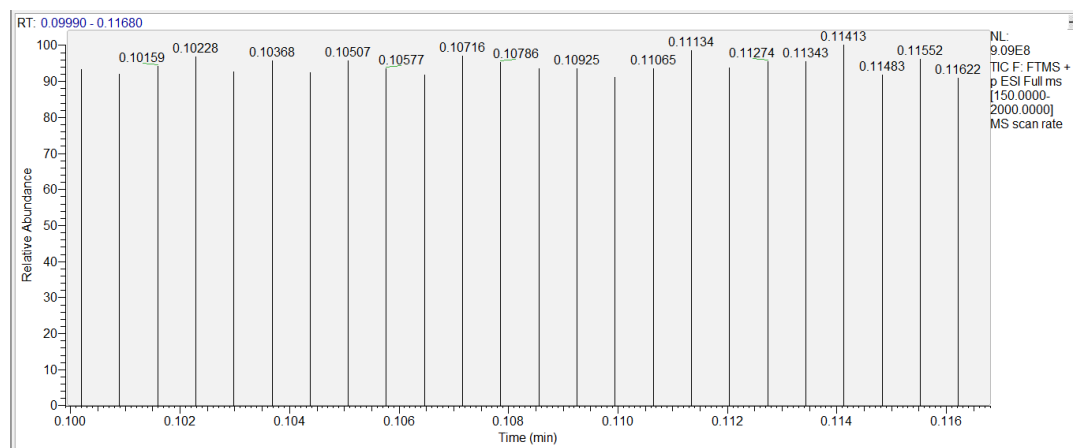


4.2 分辨率可调档: 4 档

4.3 质量范围: m/z 40-3000

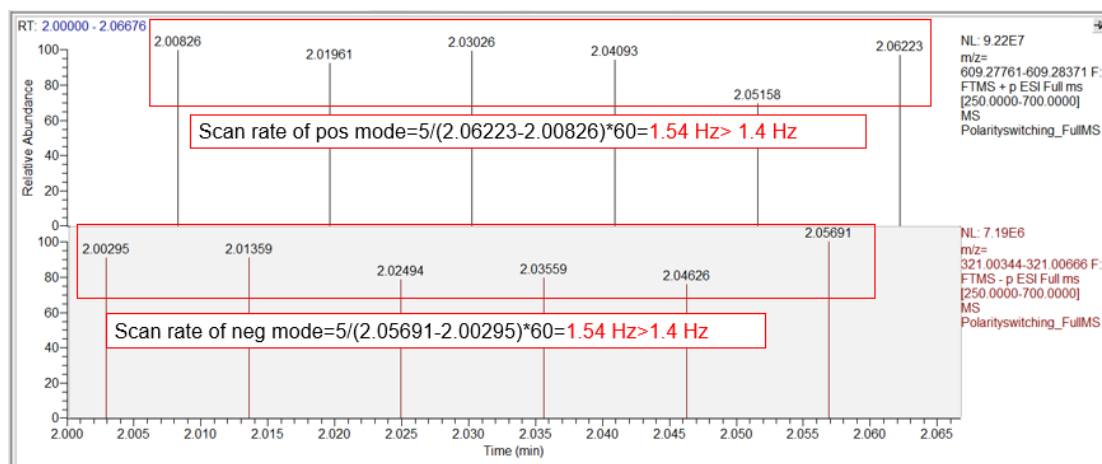


4.4 质谱最大扫描速度： $\geq 22\text{Hz}$

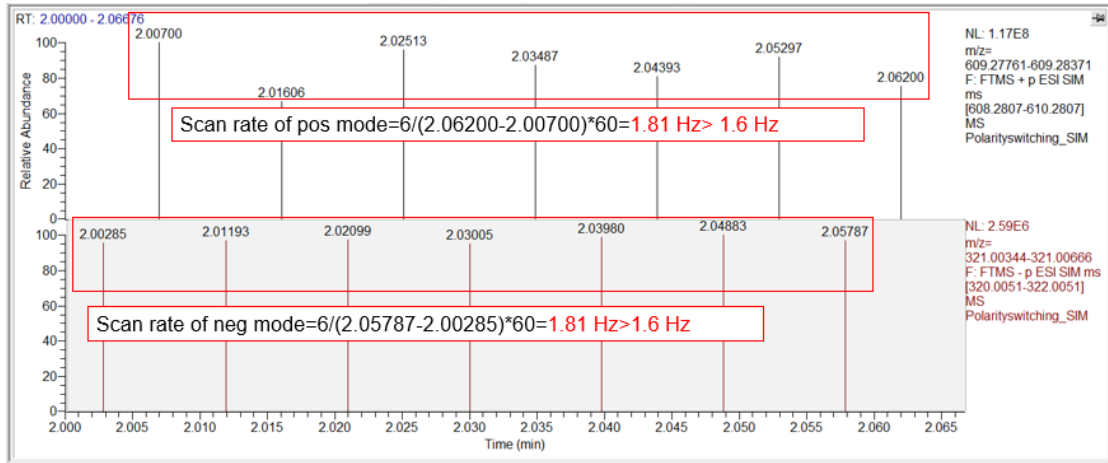


上图为分辨率设置 15000 FWHM 时，扫描速度= $21/(0.11622-0.10159)*60=23.9\text{ Hz}>22\text{Hz}$

4.5 正负极性切换扫描速度：分辨率 60,000 FWHM 条件下，全扫描模式正负切换时间 $<700\text{ms}$ ，等效扫描速度 $>1.4\text{ Hz}$ ；tSIM 模式下正负切换时间 $<600\text{ms}$ ，等效扫描速度 $>1.6\text{Hz}$ 。



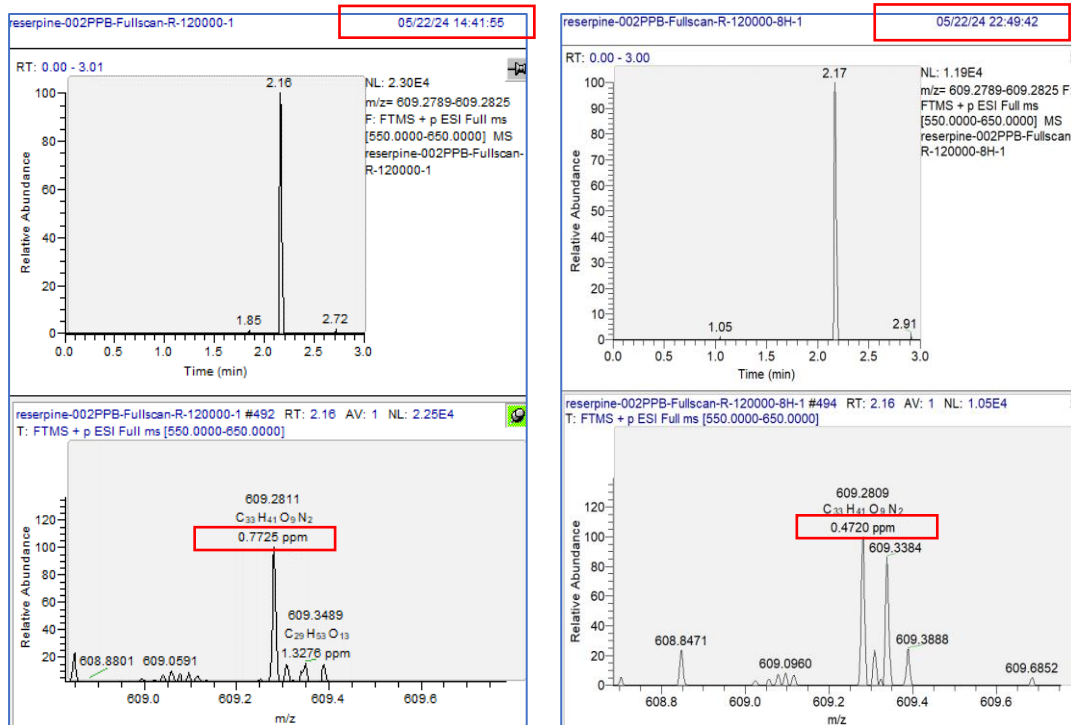
(实验测试数据显示全扫描 Full MS 模式下正负极性切换速度 $>1.4\text{Hz}$)

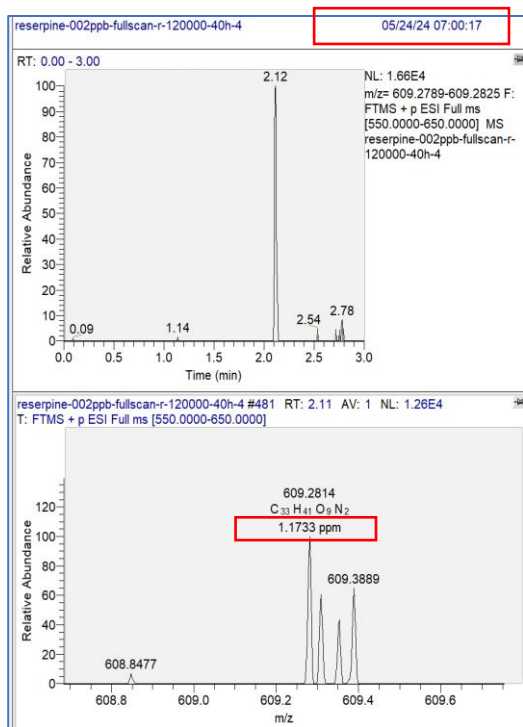
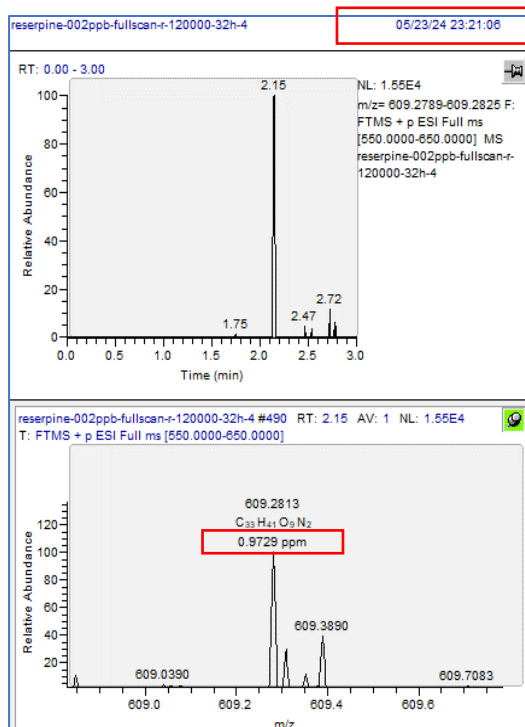
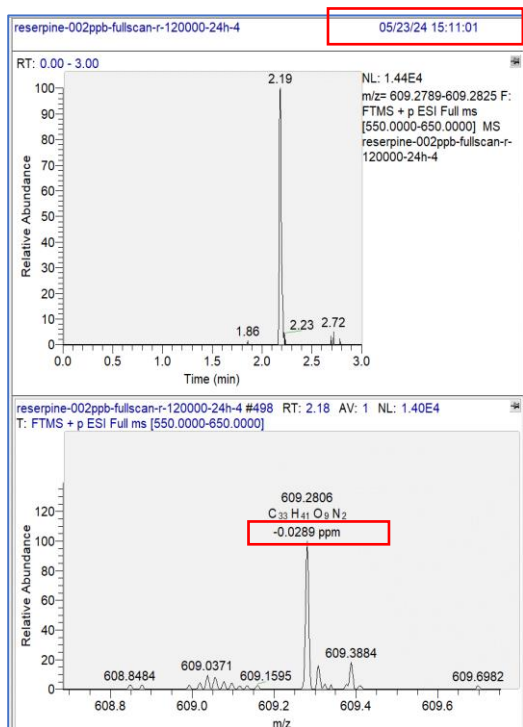
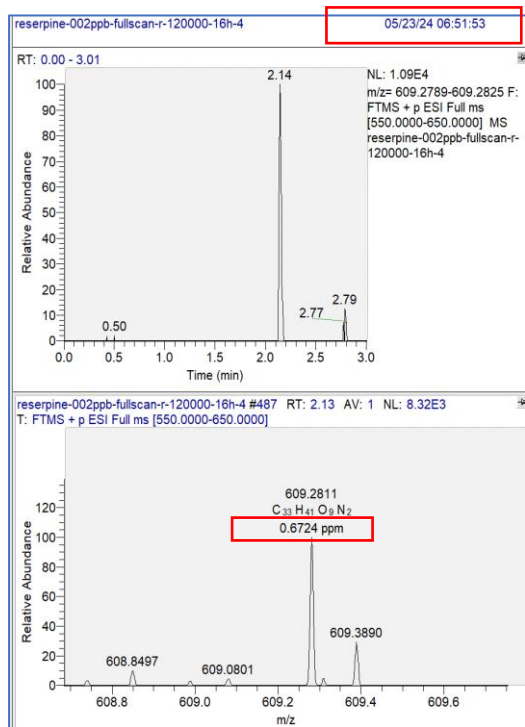


(实验测试数据显示 tSIM 模式下正负极性切换速度 > 1.6HZ)

4.6 质量轴稳定性

4.6.1 设备经过一次校正后，在 48 小时内不再校正且不使用内标情况下，在 120,000 分辨率的条件下进行全扫描，连续 48 小时内重复进样，100fg 利血平每 8 小时进样一针，m/z 609 质量精确度 ≤ 3ppm。





4.6.2 通过实时内标校正离子源，可自动实时校正一级质谱和二级质谱，实现至少连续 5 天 <1 ppm 的质量偏差，以提高定性准确性。

4.6.3 正负离子切换采集：正负离子切换速度≤1s，设备在进行快速切换（分辨率正/负都在 70000）一次进样可进行正负离子同时采集，在 2 小时内不断实现正负切换质量轴的稳定性

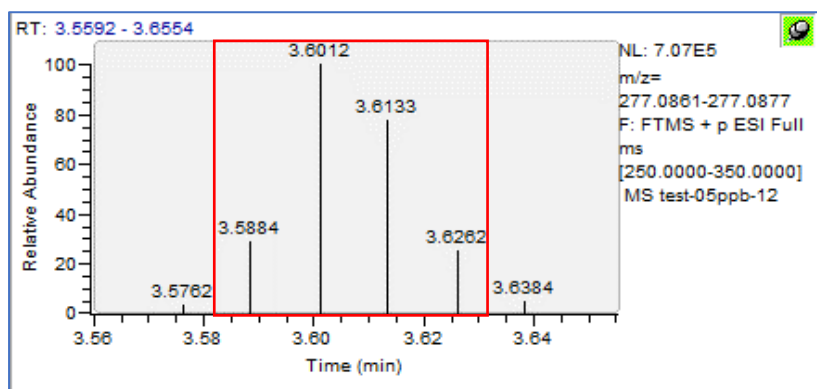
均<3ppm；即用 0.5 ppb 氯霉素和 0.5 ppb 克伦特罗混合溶液作为测试液，正负快速扫描同时监测氯霉素和克伦特罗分子离子峰，两者质量稳定性偏差小于 3ppm。外标法校正一次不采用内标校正的情况下一次进样同时正负离子 2 小时内不断切换采集的实验室数据结果及谱图如下：

1) 实验条件：0.5 ppb 氯霉素和 0.5 ppb 克伦特罗混合溶液作为测试液，正负离子切换扫描同时监测氯霉素和克伦特罗分子离子峰，外标法校正一次，不采用内标校正，每次进样运行 10 分钟，连续进样 12 次，合计 2 小时。

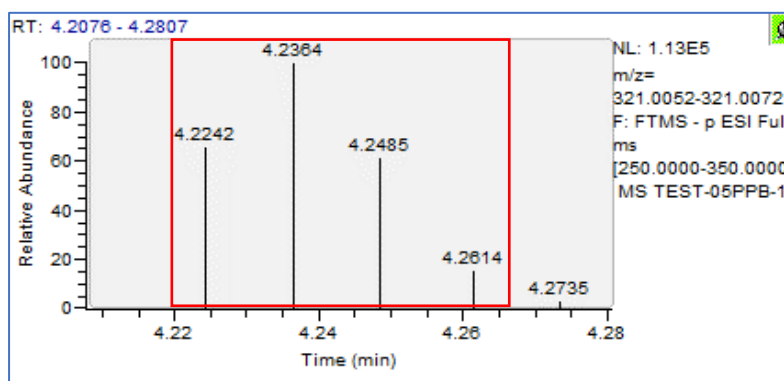
TEST-05PPB-1.raw	5/31/2024 7:22 PM
TEST-05PPB-2.raw	5/31/2024 7:32 PM
TEST-05PPB-3.raw	5/31/2024 7:43 PM
TEST-05PPB-4.raw	5/31/2024 7:54 PM
TEST-05PPB-5.raw	5/31/2024 8:05 PM
TEST-05PPB-6.raw	5/31/2024 8:16 PM
TEST-05PPB-7.raw	5/31/2024 8:27 PM
TEST-05PPB-8.raw	5/31/2024 8:38 PM
TEST-05PPB-9.raw	5/31/2024 8:49 PM
TEST-05PPB-10.raw	5/31/2024 9:00 PM
TEST-05PPB-11.raw	5/31/2024 9:11 PM
TEST-05PPB-12.raw	5/31/2024 9:22 PM

2) 克伦特罗在 3.61 min 出峰，氯霉素在 4.23 min 出峰。

3) 正负离子切换速度 $\leq 1s$ ，即 $\geq 1Hz$

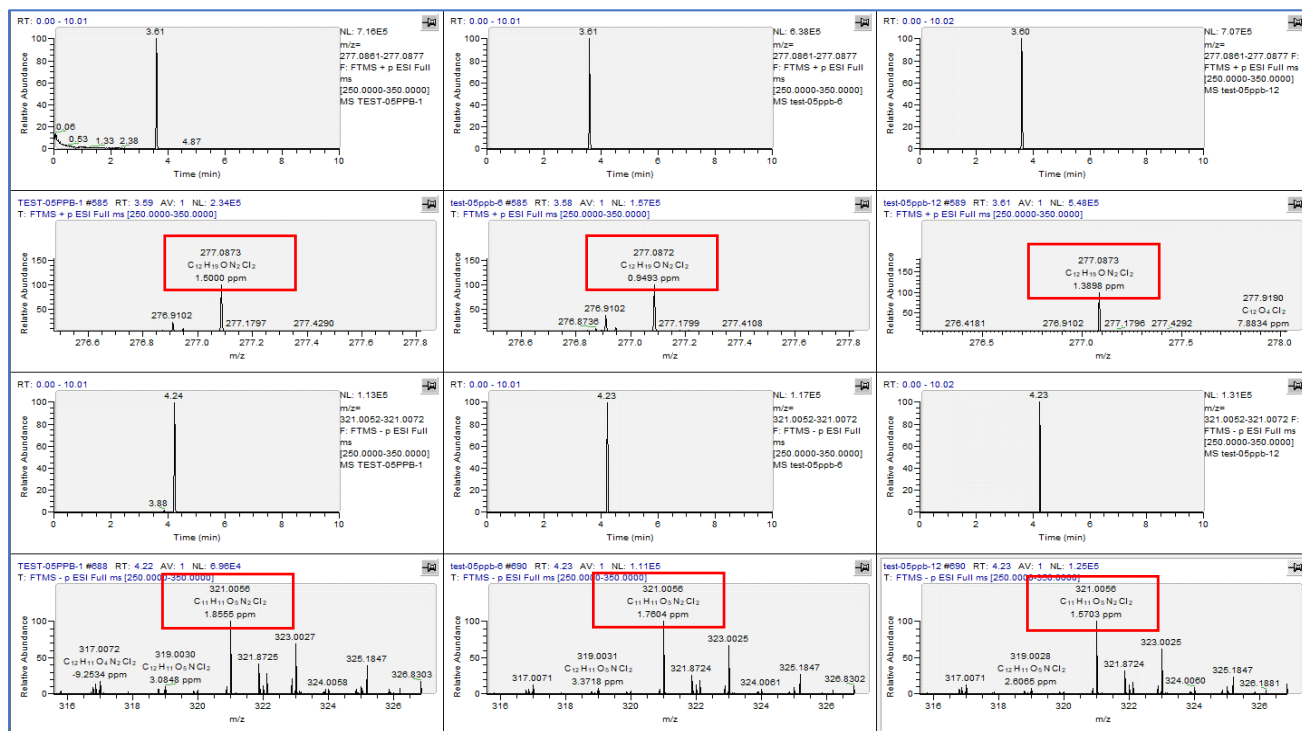


依据克伦特罗谱图计算的扫描速度=切换次数/[(t2-t1)*60]=3/[(3.6262-3.5884)*60]=1.3Hz



依据氯霉素谱图计算的扫描速度=切换次数/[(t2-t1)*60]=3/[(4.2614-4.2242)*60]=1.3Hz

4) 在 2 小时内不断实现正负切换质量轴的稳定性均<3ppm:



第 1 次进样

第 6 次进样

第 12 次进样

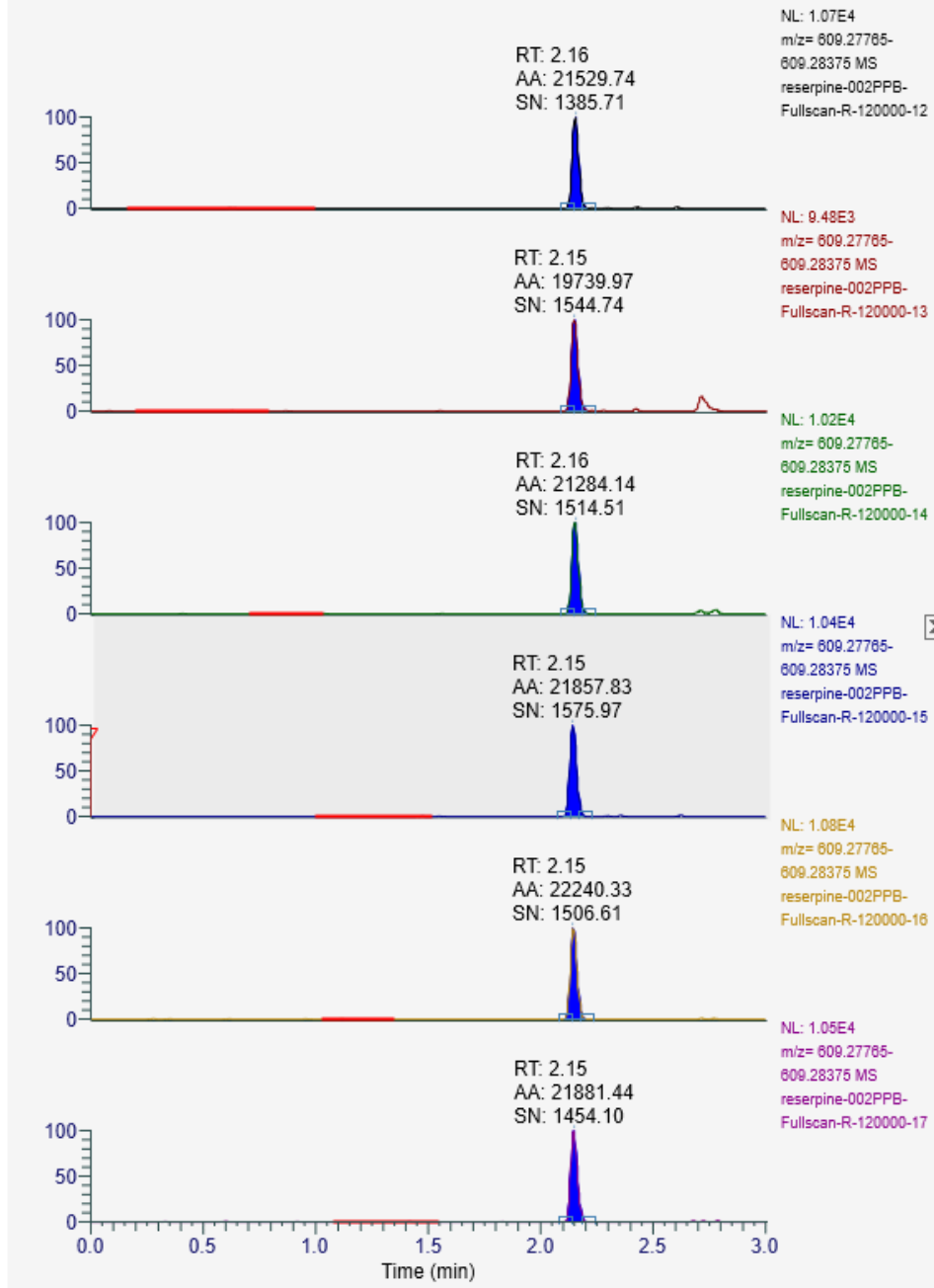
4.6.4 质量精度: 对于质量范围在 100~500amu 区间内的 50 个化合物进行同时检测时, 50 μ g/kg 浓度水平时, 进样 10 μ L, 外标法 \leq 2 ppm, 内标法 \leq 1 ppm, 而且 MS 或者 MS/MS 均能达到此质量精度。

4.7 灵敏度

4.7.1 定量方式: 可采用高分辨 MS 和高分辨 MS/MS 定量, MS 和 MS/MS 分辨率>50000。

4.7.2 MS 全扫描灵敏度 (分辨率保持在 70000 FWHM 或以上时): 质量窗口 \leq 5ppm, 100fg 利血平柱上进样 S/N 优于 1000:1, 连续进样 6 针, RSD<5%。

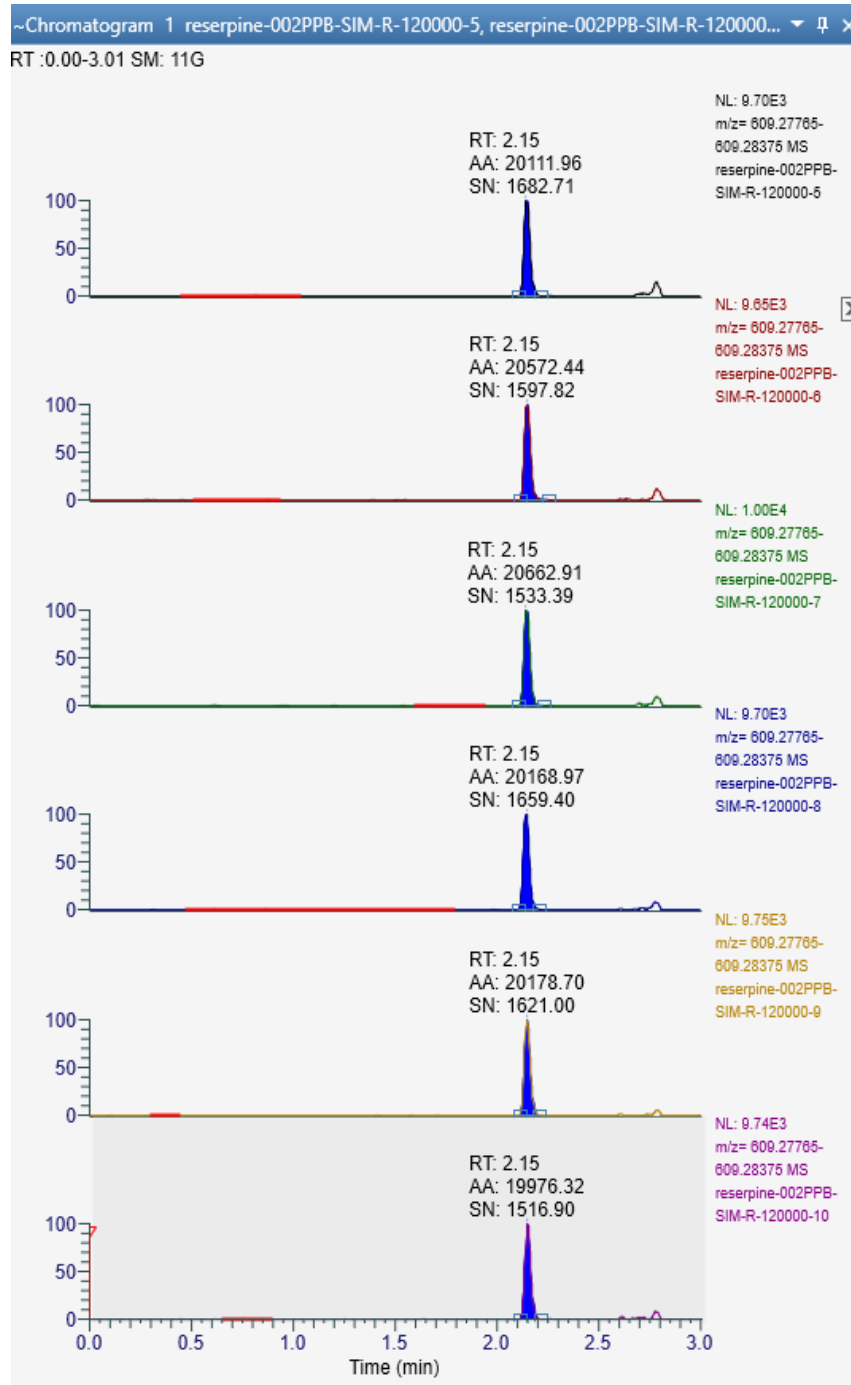
RT: 0.00-3.01 SM: 11G



进样编号#	S/N	峰面积
1	1385.71	21529.74
2	1544.74	19739.97
3	1514.51	21284.14
4	1575.97	21857.83
5	1506.61	22240.33

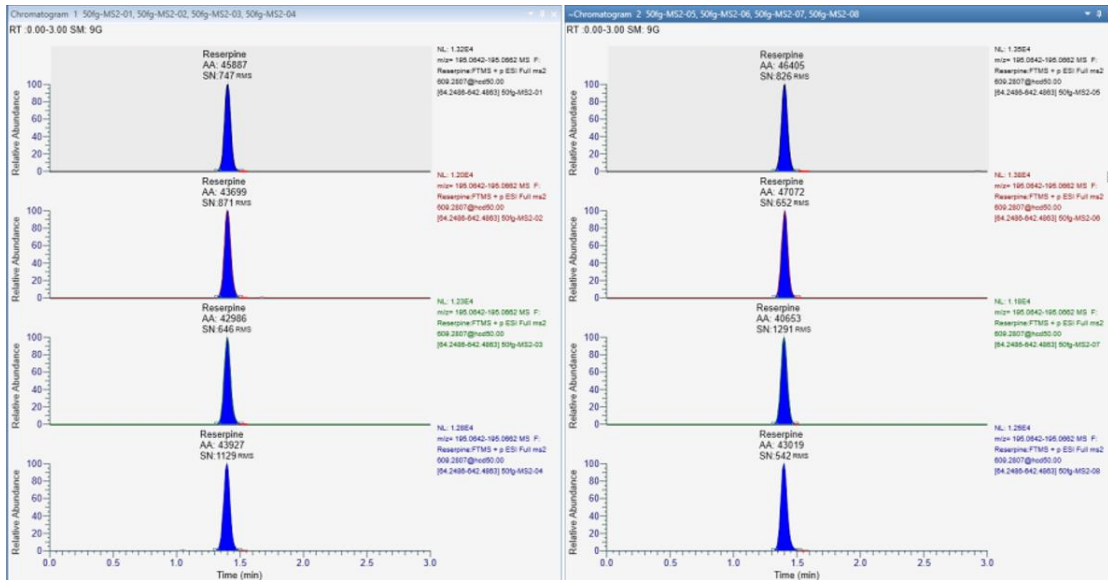
6	1454.10	21881.44
平均值	1496.94	21422.24
RSD	4.5%	4.1%

4.7.3 选择离子扫描 SIM 灵敏度(分辨率保持在 70000 FWHM 或以上时):质量窗口 $\leq 5\text{ppm}$, 100fg 利血平柱上进样 S/N 优于 1500:1, 连续进样 6 针, RSD $<5\%$ 。



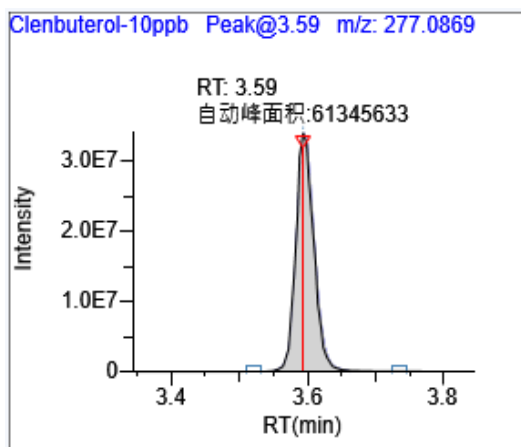
进样编号#	S/N	峰面积
1	1682.71	20111.96
2	1597.82	20572.44
3	1533.39	20662.91
4	1659.40	20168.97
5	1621.00	20178.70
6	1516.90	19976.32
平均值	1601.87	20278.55
RSD	4.2%	1.4%

4.7.4 MS/MS 灵敏度: 50fg 利血平进样, S/N≥500:1 (分辨率>50000 FWHM)

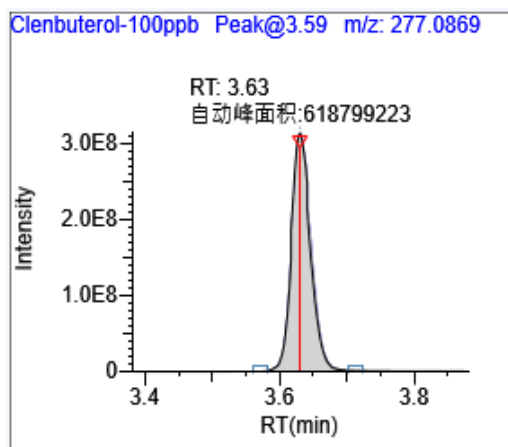


4.7.5 动态范围: 分辨率设定为 120000 (FWHM) 时, 以克伦特罗为目标物进行全扫描, 质量窗口 $\leq 3\text{ppm}$, 一条标准曲线不分段线性范围 $\geq 10^5$ (6 个浓度点, 分别为 1ppt、10ppt、100ppt、1ppb、10ppb 和 100ppb 作为一条标准曲线), 且标准曲线每点的偏差值 $<10\%$ 。实验室数据谱图如下:

1) 实验条件

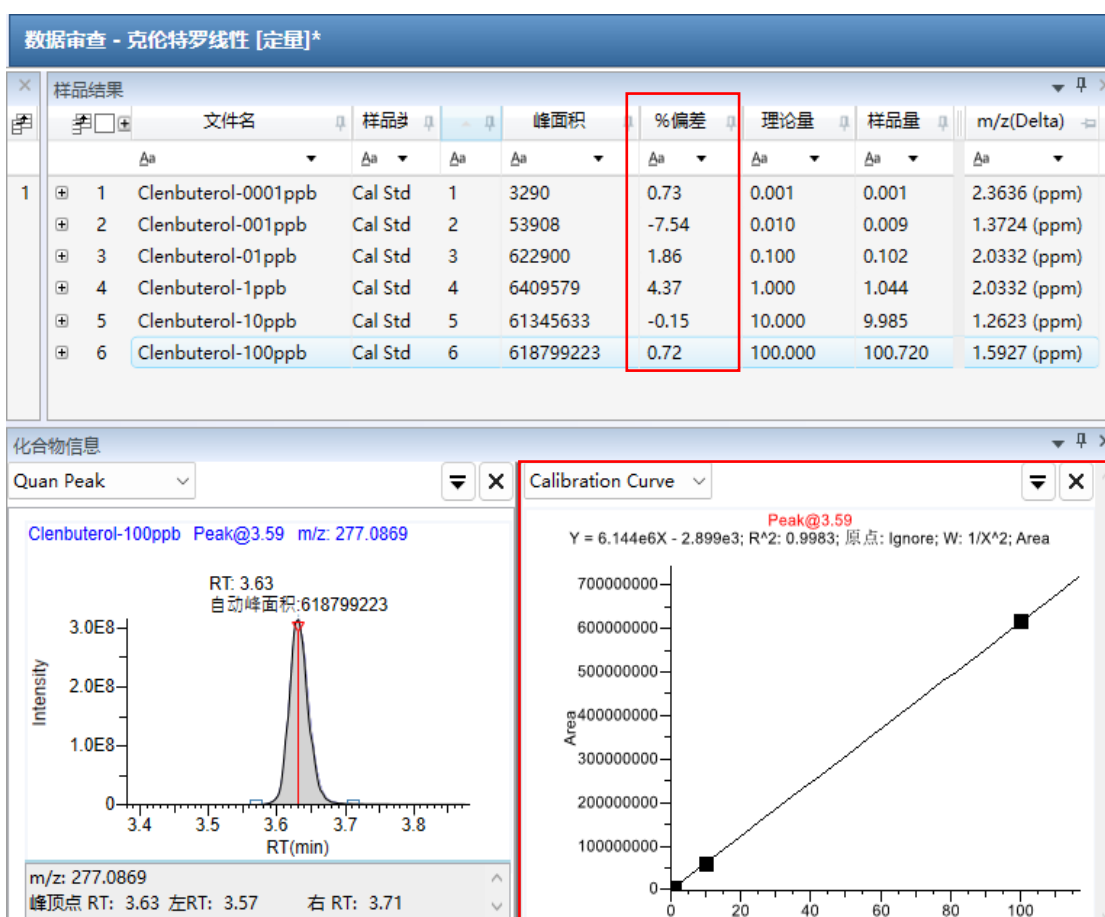


10ppb



100ppb

3) 数据处理结果



6个浓度点，分别为 1ppt、10ppt、100ppt、1ppb、10ppb 和 100ppb 可作一条标准曲线，且标准曲线每点的偏差值<10%。

4.7.6 仪器在提高仪器分辨率时灵敏度基本保持不降低。采用利血平标品 100fg 进样进行全扫描，ESI+模式下，分辨率分别为 30000 和 60000 时，其它仪器参数维持不变的前提下，质量窗口≤3ppm，峰面积的信号强度值相差不超过 5%，实验数据谱图如下：

1) 分辨率为 30000 的实验条件及谱图（3 针进样）：

4.8 扫描模式

4.8.1 高分辨全扫描，包括 MS 和 MS/MS

4.8.2 高分辨选择离子扫描 tSIM

4.8.3 高分辨全子离子碰撞碎裂扫描 AIF

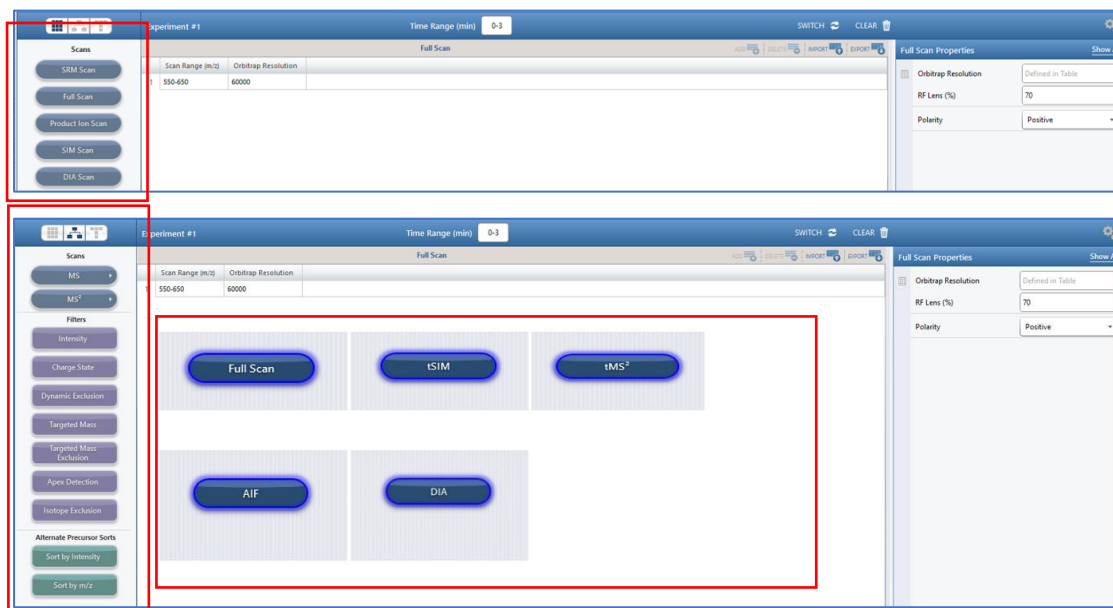
4.8.4 高分辨 SRM 扫描

4.8.5 高分辨正负离子切换扫描

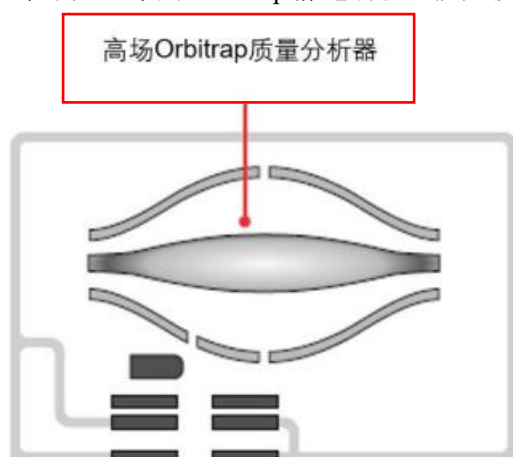
4.8.6 高分辨数据依赖子离子扫描 FullMS-ddMS2

4.8.7 高分辨数据非依赖扫描 DIA

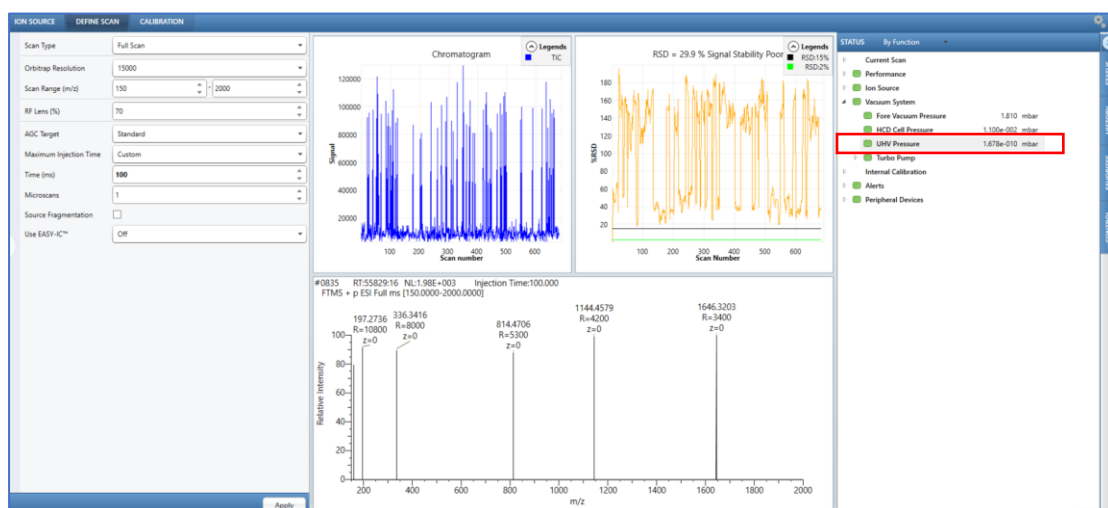
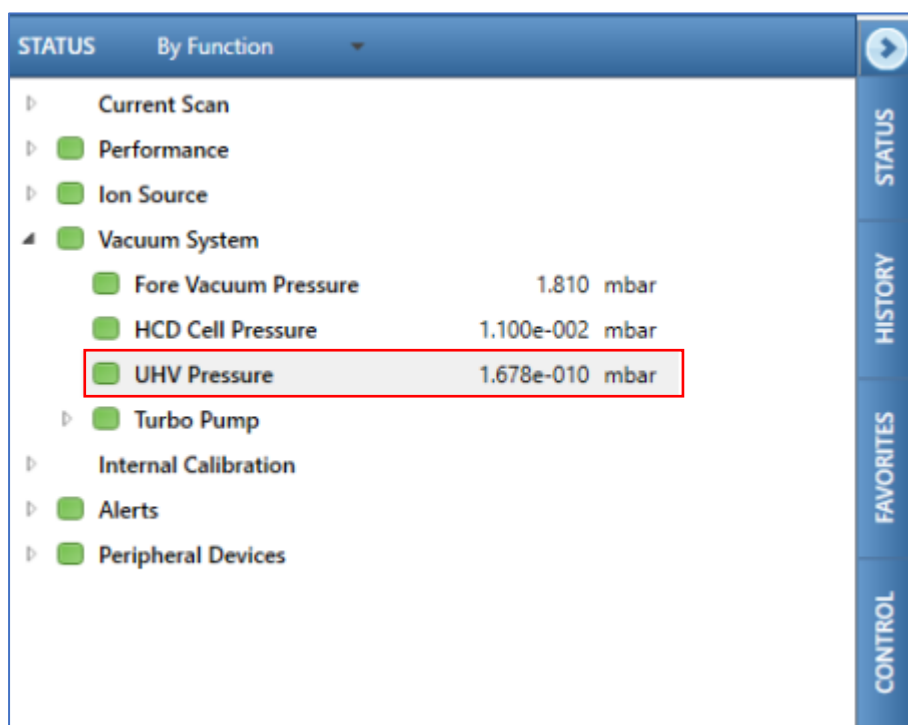
4.8.8 扫描模式软件截图如下：



5、检测器：采用 Orbitrap 静电场轨道阱无损 FT 检测器



6、高分辨质量分析器：真空度 1.678×10^{-10} mbar，YS HR 1080MD 真空度实时截屏如下：



7、软件及数据处理系统

7.1 主流系统工作站（正版质谱分析软件、Windows 与 Office 套件），提供 LC 和 MS/MS 的全自动控制；简洁人性化的操作界面可以实现高效的仪器调谐和方法优化，方法优化还包括碰撞气压力以及碰撞能量的自动优化，并可利用优化后的参数快速便捷地建立分析方法；工作站及软件具备数据采集、数据处理、定性定量分析、建立数据库、谱库检索等功能；Windows 10 英文操作系统（64bit），软件能够满足当今分析检测实验室需求，提供能够实现最优化痕量分析的全套系统解决方案。

7.2 色谱质谱数据分析软件，具备同位素模式匹配、精确质量计算、精确二级碎片结构推断功能。

7.3 独立定量分析软件，可进行大规模批处理数据。内置高分辨定量分析即插即用食品安全数据库。

7.4 定性数据分析软件，可用于组学领域的非标记差异分析软件，可实现非目标性的筛查、

鉴定、统计学差异性分析及生物学通路分析；半靶标预测性分析，如给定母药的药物代谢、杂质分析、降解产物分析等。数据库资源包括：高分辨标准品数据库：化合物覆盖环境、药物、代谢物等不同应用方向，提供>20,000 个化合物，>8,500,000 张高分辨图谱，每月实时更新且免费更新；软件的搜索引擎可以做到自动搜库，鉴定未知物。



7.5 未知物鉴定数据库以及化合物的谱图结构解析软件，可支持 ESI, APCI, EI 和 CI 等离子源不同的裂解机理，可以通过化学智能的谱图注释、先进的裂解预测以及谱图和裂解机理知识管理来进行可靠的结构解析。

二、使用指标

1、详见附件提供的仪器制造商应用文献证明--《离子色谱串联 YS HR 1080MD 分析强极性农残草铵膦、草甘膦及其代谢物》、《基于 YS HR 1080MD 技术的 LC-MS/MS 方法同时分析玉米质动物饲料中的霉菌毒素》、《基于高分辨质谱 (HRMS) YS HR 1080MD 质谱仪对多类兽药进行筛查和定量分析》

1.1 YS HR 1080MD 高分辨质谱可以和离子色谱仪联用分析强极性农残草铵膦、草甘膦及其代谢物：一针进样 15 min 以内可以分析多种极性农残，将高浓度标准品逐级稀释，配制成系列标准曲线 0.01 ng/mL、0.05 ng/mL、0.1 ng/mL、0.5 ng/mL、1.0 ng/mL、5.0 ng/mL、10.0 ng/mL、50 ng/mL、100 ng/mL、500 ng/mL、1000 ng/mL，检验草甘膦、AMPA、草铵膦定量限 (LOQ) 应分别为：≤0.01 ng/mL、≤0.05 ng/mL、≤0.05 ng/mL。

1.2 YS HR 1080MD 高分辨质谱能够基于 QuEChERS 方法对多种霉菌毒素化合物进行快速筛查和定量分析：采用至少三种扫描模式，对 15 种霉菌毒素 (3-乙酰基脱氧雪腐镰刀菌烯醇、黄曲霉毒素 B1、黄曲霉毒素 B2、黄曲霉毒素 G1、黄曲霉毒素 G2、 α -玉米赤霉烯醇、脱氧雪腐镰刀菌烯醇、伏马菌素 B1、伏马菌素 B2、伏马菌素 B3、HT2-毒素、T2-毒素、雪腐镰刀菌烯醇、赭曲霉毒素 A 和玉米赤霉烯酮) 进行 5 种以上浓度水平的基质加标分析所有 15 种霉菌毒素的校正曲线线性相关系数均相当 ($R^2 > 0.995$)，加标回收率良好 (80-120%)，对玉米赤霉烯酮扫描测得的质量精度 < 5 ppm。

1.3 YS HR 1080MD 高分辨质谱能够进行多类兽药进行筛查和定量分析：能够通过建立检测

概率 POD 评价方法对较宽 MRL 范围内的样品进行分析。